(19) 世界知的所有権機関 国際事務局



(43) 国際公開日 2004年12月29日(29.12.2004)

PCT

(10) 国際公開番号 WO 2004/113905 A1

(51) 国際特許分類7:

G01N 27/62, H01J 49/26

(21) 国際出願番号:

)

PCT/JP2003/007923

(22) 国際出願日:

2003年6月23日(23.06.2003)

(25) 国際出願の言語:

日本語

(26) 国際公開の言語:

日本語

- (71) 出願人(米国を除く全ての指定国について): 株式会 社日立ハイテクノロジーズ (HITACHI HIGH-TECH-NOLOGIES CORPORATION) [JP/JP]; 〒105-8717 東 京都港区西新橋一丁目24番14号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者; および

(

(75) 発明者/出願人(米国についてのみ): 山下 博教 (YA-MASHITA, Hiromichi) [JP/JP]; 〒312-0033 茨城県 ひた

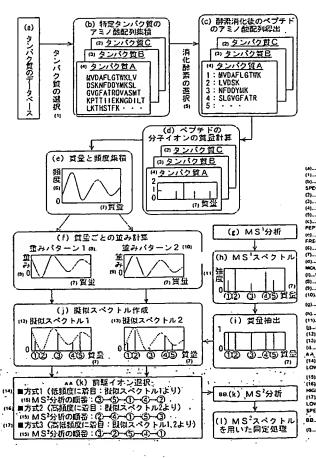
ちなか市 市毛1040番地 株式会社日立サイエンス システムズ内 [baraki (JP). 加藤 義昭 (KATO, Yoshiaki) [JP/JP]; 〒312-8504 茨城県 ひたちなか市 市毛8 8 2番 地 株式会社日立ハイテクノロジーズ 設計・製造統 括本部 那珂事業所内 Ibaraki (JP).

- (74) 代理人: 作田 康夫 (SAKUTA, Yasuo), 〒100-8220 東京 都 千代田区 丸の内一丁目 5番 1号 株式会社日立製 作所内 Tokyo (JP).
- (81) 指定国 (国内): JP, US.
- (84) 指定国 (広域): ヨーロッパ特許 (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT, RO, SE, SI, SK, TR).

/続葉有/

(54) Title: MASS ANALYSIS METHOD AND MASS ANALYSIS APPARATUS

(54) 発明の名称: 質量分析方法および質量分析装置



(4)...PROTEIN A
(5)...SELECTING DIGESTION ENZYME
(c)...DERIVATION OF AMINO ACID SEQUENCE OF
PETIDE AFTER ENZYME DIGESTION
(c)...STATISTICAL PROCESSING OF MASS AND
FREQUENCY
(6)...FREQUENCY
(7)...MASS (7)...MASS (d)...CALCULATION OF MASS OF PEPTIDE MOLECULAR ION (I)...WEIGHT CALCULATION FOR EVERY MASS (8)...WEIGHT PATTERN 1 (9)...WEIGHT (10)...WEIGHT PATTERN 2 (g)...MS ANALYSIS (h)...MS SPECTRUM (13)...WTENSTY

()...CREATING PSEUDO SPECTRUM

(13)...PSEUDO SPECTRUM 1

(13)...PSEUDO SPECTRUM 1

(13)...PSEUDO SPECTRUM 2

(14)...METHOD SPECTRUM 3

A. (1).SELECTUM GENUSOR ION

(14)...METHOD 1 CONCENTRATING CONSIDERING

LOW FROULENCY: FROM PSEUDO SPECTRUM 1

(15)...METHOD 2 (CONCENTRATING CONSIDERING

(15)...METHOD 2 (CONCENTRATING CONSIDERING

(17)...METHOD 3 (CONCENTRATING CONSIDERING

LOW AND MGS FREQUIENCY: FROM PSEUDO SPECTRUM 2

(17)...METHOD 3 (CONCENTRATING CONSIDERING

LOW AND MGS FREQUIENCY: FROM PSEUDO

SPECTRUM 1 AND 21).

BB...OK) MIS 2 ANALYSIS

ID. IDENTIFICATION USING MS2 SPECTRUM

(57) Abstract: A method for quickly and precisely identifying a protein or peptide by means of a mass analysis apparatus. Specifically, a sample is ionized, and a protein is analyzed by means of a mass analysis apparatus. From a database where information on proteins and peptides are stored, predetermined information selected, the mass of the selected component is inferred frequency information on each mass is calculated, the sample is analyzed by means of a mass analysis apparatus to obtain the mass spectrum, the mass used for the identification is selected on the basis of the obtained mass spectrum and the frequency information, mass analysis is conducted using the selected mass spectrum as a precursor ion, and the identification using the obtained mass spectrum is conducted. Thus, a precursor ion used for obtaining an MS/MS spectrum necessary for identification using frequency information matching the object of analysis is efficiently selected.

٠.

/続葉有/

2文字コード及び他の略語については、定期発行される各*PCT*ガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

⁽⁵⁷⁾ 要約: 本発明は、質量分析装置を用いてタンパク質やペプチドの同定を行う場合に、より高速且つ高確度に同定を行うことが可能な質量分析方法および装置を提供する。具体的には、試料をイオン化し、質量分析装置を用いてタンパク質の分析を行う質量分析方法において、タンパク質やペプチドの情報が格納されたデータベースより、所定の情報を選出し、当該選出された成分の質量を推測し、質量ごとの頻度情報を算出し、試料を質量分析装置によって分析してマススペクトルを得、当該得られたマススペクトルと前記頻度情報に基づいて同定に用いるべき質量を選出し、当該選出された質量のマススペクトルを前駆イオンとして質量分析し、得られたマススペクトルを用いて同定処理を行う。これにより、分析の目的に合致した頻度情報を用いて同定処理に必要なMS/MSスペクトルを得るための前駆イオンを効率良く選択することができる。